Κβαντικοί Υπολογιστές και Αλγόριθμοι

Διάλεξη 4η

Θωμάς Καμαλάκης

Χαροκόπειο Πανεπιστήμιο Αθηνών

2025

Περιεχόμενα

1. Ιδιότητες Πινάκων (συνέχεια)
2. Θεμελίωση της Κβαντικής Φυσικής

Διαγωνιοποίηση και προβολές

- Υπάρχει μία πολύ χρήσιμη συνέπεια της διαγωνιοποίησης ενός κανονικού πίνακα.
- Έστω $A = V \Lambda V^{\mathrm{T}}$ η διαγώνια μορφή του πίνακα A.
- Ο πίνακας V έχει στοιχεία $\bar{v}_{pq} = v_{qp}$ όπου v_{qp} είναι η $p^{\text{οστή}}$ συνιστώσα του ιδιοδιανύσματος $|v_q\rangle$.
- Τα στοιχεία c_{pq} του $V\Lambda$ δίνονται από την σχέση:

$$c_{pq} = \sum_{k=1}^{N} \bar{v}_{pk} \lambda_k \delta_{kq} = v_{qp} \lambda_q$$

- Τα στοιχεία ϵ_{pq} του $V\Lambda V^{\mathrm{T}}$ δίνονται από την σχέση:

$$\epsilon_{pq} = \sum_{k=1}^{N} c_{pk} \bar{v}^{*}_{qk} = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k v^{*}_{kq} v_{kp}$$

Διαγωνιοποίηση και προβολές

- Ας δούμε τώρα πως δρα ο πίνακας A σε ένα διάνυσμα $|\psi\rangle$,

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ \cdots \\ a_N \end{bmatrix}$$

- Το διάνυσμα $|\phi\rangle = A|\psi\rangle$ θα έχει συντεταγμένες b_p που δίνονται από την σχέση:

$$b_p = \sum_{q=1}^{N} e_{pq} a_q = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k v_{kp} \sum_{q=1}^{N} \left\{ v_{kq}^* a_q \right\}$$

- Είναι εύκολο να δούμε ότι το εσωτερικό άθροισμα ως προς q είναι απλά το εσωτερικό γινόμενο $\langle v_k|\psi\rangle$.

Διαγωνιοποίηση και προβολές

- Οπότε έχουμε:

$$b_p = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k \langle v_k|\psi\rangle \, v_{kp}$$

- Στην παραπάνω σχέση πολλαπλασιάζουμε με $|p\rangle$ και αθροίζουμε ως προς p:

$$|\phi\rangle = \sum_{p=1}^{N} b_p \, |p\rangle = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k \langle v_k|\psi\rangle \sum_{p=1}^{N} v_{kp} \, |p\rangle$$

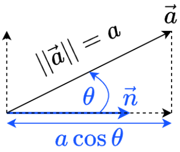
- Το εσωτερικό άθροισμα στο τελευταίο μέρος της εξίσωσης είναι απλά το $|v_k\rangle$ οπότε:

$$|\phi\rangle = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k \, |v_k\rangle \langle v_k|\psi\rangle$$

- Η παραπάνω σχέση περιγράφη τη δράση του πίνακα A πάνω στο $|\psi\rangle$ μέσω των ιδιοδιανυσμάτων του $|v_k\rangle$ και των ιδιοτιμών του λ_k.

Διαγωνιοποίηση και προβολές

- Έχει ένα ενδιαφέρον να εξετάσουμε τι είναι το $|v_k\rangle \langle v_k|\psi\rangle = \langle v_k|\psi\rangle\, |v_k\rangle$.
- Ας θυμηθούμε την γεωμετρία:
- Αν προβάλουμε ένα διάνυσμα $\vec{a}$ στο μοναδίαιο διάνυσμα $\vec{n}$ τότε το μήκος της προβολής είναι $a\cos\theta$, όπου $\|\vec{a}\| = a$ και θ η γωνία μεταξύ των διανυσμάτων.
- Στην γεωμετρία το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων είναι $\vec{n}\cdot\vec{a} = \|\vec{a}\|\|\vec{n}\|\cos\theta = a\cos\theta$.
- Εφόσον η προβολή είναι στην κατεύθυνση του $\vec{n}$ θα ισούται με $(\vec{n}\cdot\vec{a})\vec{n}$



Διαγωνιοποίηση και προβολές

- Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να ερμηνεύσουμε το $\langle v_k|\psi\rangle\,|v_k\rangle$.
- Τον ρόλο του γεωμετρικού εσωτερικού γινομένου $\vec{n}\cdot\vec{a}$ τον παίζει τώρα το $\langle v_k|\psi\rangle$.
- Το $|v_k\rangle$ που ακολουθεί εξασφαλίζει ότι το διάνυσμα είναι παράλληλο με το $|v_k\rangle$ όπως ακριβώς το $\vec{n}$ μετά το $\vec{n}\cdot\vec{a}$.
- Το $\Pi_k = |v_k\rangle\langle v_k|$ είναι ένας $N\times N$ πίνακας με στοιχεία π_{pq} που δίνονται από την σχέση:

$$\pi_{pq} = \sum_{k=1}^{N} v_{kp} v_{qk}^{*}$$

- Δεδομένου ότι $\langle v_k|\psi\rangle\,|v_k\rangle = |v_k\rangle\langle v_k|\psi\rangle$ μπορούμε να ερμηνεύσουμε το $\Pi_k = |v_k\rangle\langle v_k|$ ως τον πίνακα που όταν πολλαπλασιάζεται με οποιοδήποτε διάνυσμα $|\psi\rangle$ μας δίνει την προβολή του $|\psi\rangle$ ως προς το $|v_k\rangle$

Διαγωνιοποίηση και προβολές

- Επομένως οποιοσδήποτε πίνακας A διαγωνιοποιείται, στην ουσία γράφεται ως άθροισμα των πινάκων προβολών Π_k στα ιδιοδιανύσματα του $|v_k\rangle$ επί τις αντίστοιχες ιδιοτιμές λ_k
$$A = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k \Pi_k$$
- Υπάρχουν μερικές πολύ ενδιαφέρουσες ιδιότητες για τους πίνακες προβολών Π_k.
$$\Pi_k^2 = |v_k\rangle \langle v_k|v_k\rangle \langle v_k| = |v_k\rangle \langle v_k| = \Pi_k$$
- Εάν $p \neq q$ τότε:
$$\Pi_p \Pi_q = |v_p\rangle \langle v_p|v_q\rangle \langle v_q| = 0$$

Παράδειγμα

- Για τον πίνακα A που δίνεται από την σχέση:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

- είχαμε υπολογίσει τις ιδιοτιμές του: $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0$ και $\lambda_3 = 2$ με τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα:

$$|v_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} \qquad |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- Ας υπολογίσουμε τους αντίστοιχους πίνακες προβολής Π_k.

Παράδειγμα

- Για τον τελεστή $\Pi_1 = |v_1\rangle\langle v_1|$ θα έχουμε:

$$|v_1\rangle\langle v_1| = \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

- Για τον τελεστή $\Pi_2 = |v_2\rangle\langle v_2|$ θα έχουμε:

$$|v_2\rangle\langle v_2| = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}0\\1\\-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1 & -1\end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 1 & -1\\0 & -1 & 1\end{bmatrix}$$

- Για τον τελεστή $\Pi_3 = |v_3\rangle\langle v_3|$ θα έχουμε:

$$|v_3\rangle\langle v_3| = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}0\\1\\1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1 & 1\end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 1 & 1\\0 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

Δυνάμεις ενός πίνακα

- Η διαγωνιοποίηση μας επιτρέπει να υπολογίσουμε εύκολα τις δυνάμεις ενός πίνακα.
- Για παράδειγμα εάν θέλουμε να υπολογίσουμε το A^2 θα έχουμε:

$$A^2 = V \Lambda V^{\mathrm{T}} V \Lambda V^{\mathrm{T}} = V \Lambda^2 V^{\mathrm{T}}$$

- Γενικότερα μπορούμε να δείξουμε:

$$A^n = V \Lambda^n V^{\mathrm{T}}$$

- Δηλαδή οι δυνάμεις του A υπολογίζονται απευθείας από το γινόμενο του πίνακα V των ιδιοδιανυσμάτων του A και του ερμιτιανού συζυγούς του V^{T} με τις δυνάμεις του διαγώνιου πίνακα Λ.

Δυνάμεις ενός πίνακα

- Οι δυνάμεις του πίνακα Λ υπολογίζονται εύκολα:

$$\Lambda^n = \begin{bmatrix} \lambda_1^n & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^n & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N^n \end{bmatrix}$$

- Με την βοήθεια των πινάκων προβολών μπορούμε επίσης να καταλήξουμε σε μία παρόμοια μορφή για τις δυνάμεις ενός πίνακα:

$$A^n = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k^n \Pi_k$$

Παράδειγμα

- Για τον πίνακα A που δίνεται από την σχέση:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

- είχαμε δει ότι ο πίνακας διαγωνιοποιείται στην μορφή $A = V \Lambda V^{\mathrm{T}}$ με:

$$V = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \qquad \Lambda = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

- Μπορούμε να υπολογίσουμε το A^3 με την βοήθεια αυτής της μορφής εφόσον:

$$A^3 = V \Lambda^3 V^{\mathrm{T}}$$

Παράδειγμα

- Θα έχουμε:

$$\Lambda^3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}$$

- Οπότε:

$$A^3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{8}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{8}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 4 \\ 0 & 4 & 4 \end{bmatrix}$$

Παράδειγμα

- Με την βοήθεια των πινάκων προβολών θα είχαμε:

$$A^3 = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k^3 \Pi_k$$

- Οπότε:

$$A^3 = 1^3 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + 0^3 \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} + 2^3 \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 4 \\ 0 & 4 & 4 \end{bmatrix}$$

Συναρτήσεις πινάκων

- Πως ορίζουμε μία συνάρτηση $f(A)$ ενός πίνακα A;
- Για παράδειγμα στην περίπτωση όπου $f(x) = \exp(x)$, πως υπολογίζουμε το $\exp(A)$;
- Ας υποθέσουμε ότι η συνάρτηση $f(x)$ για τους μιγαδικούς αριθμούς αναπτύσσεται σε σειρά Taylor, δηλαδή:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \cdots$$

- Η γενική μορφή της σειράς Taylor είναι:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n$$

- όπου $f^{(n)}(x_0)$ είναι η $n^{\text{οστή}}$ παράγωγος της $f(x)$ στο $x = x_0$. Θεωρούμε ότι η μηδενική παράγωγος είναι η ίδια η συνάρτηση, $f^{(0)}(x_0) = f(x_0)$.

Συναρτήσεις πινάκων

- Στην περίπτωση όπου $x_0 = 0$ τότε η σειρά Taylor απλοποιείται ακόμα περισσότερο:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n$$

- Η παραπάνω μορφή είναι κατάλληλη για να ορίσουμε στη περίπτωση των πινάκων το $f(A)$: Απλά αντικαθιστούμε το x με το A!

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} A^n$$

- Για έναν διαγώνιο πίνακα Λ τα πράγματα είναι ακόμα πιο απλά αφού ισχύει:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots 0 & \\ 0 & \lambda_2 & \cdots 0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots \lambda_N & \end{bmatrix} \rightarrow \Lambda^n = \begin{bmatrix} \lambda_1^n & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^n & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N^n \end{bmatrix}$$

Συναρτήσεις πινάκων

- Οπότε:

$$f(\Lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \Lambda^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \begin{bmatrix} \lambda_1^n & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^n & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N^n \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \lambda_1^n & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \lambda_N^n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(\lambda_1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & f(\lambda_N) \end{bmatrix}$$

- Οπότε *ειδικά στην περίπτωση των διαγώνιων πινάκων* εφαρμόζουμε την συνάρτηση $f()$ σε κάθε ένα από τα διαγώνια στοιχεία.

Συναρτήσεις πινάκων

- Για τους κανονικούς πίνακες έχουμε $A^n = V\Lambda^n V^{\mathrm{T}}$ οπότε:

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} A^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} V\Lambda^n V^{\mathrm{T}} = V\left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \Lambda^n\right) V^{\mathrm{T}} = Vf(\Lambda)V^{\mathrm{T}}$$

- Επομένως για να υπολογίσουμε την συνάρτηση $f(A)$ ενός πίνακα A, μπορούμε να τον διαγωνιοποιήσουμε στην μορφή $A = V\Lambda V^{\mathrm{T}}$ και μετά να εφαρμόσουμε την $f()$ στο διαγώνιο πίνακα Λ. Στη συνέχεια:

$$f(A) = Vf(\Lambda)V^{\mathrm{T}}$$

- Εναλλακτικά μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τους πίνακες προβολής:

$$f(A) = \sum_{k=1}^{N} f(\lambda_k)\Pi_k$$

Παράδειγμα

- Έστω ότι θέλουμε υπολογίσουμε το $\exp(A)$ όπου

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

- είχαμε δει ότι ο πίνακας διαγωνιοποιείται στην μορφή $A = V \Lambda V^{\mathrm{T}}$ με:

$$V = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \qquad \Lambda = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

- Σύμφωνα με την ανάλυση που κάναμε:

$$A = V \exp(\Lambda) V^{\mathrm{T}}$$

Παράδειγμα

- Θα έχουμε:

$$\exp(\Lambda) = \begin{bmatrix} e^1 & 0 & 0 \\ 0 & e^0 & 0 \\ 0 & 0 & e^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^2 \end{bmatrix}$$

- οπότε:

$$A = V\exp(\Lambda)V^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{e^2}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{e^2}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2e & 0 & 0 \\ 0 & e^2+1 & -(e^2+1) \\ 0 & -(e^2+1) & e^2+1 \end{bmatrix}$$

Πίνακες που αντιμετατίθενται

- Το γινόμενο δύο πινάκων A και B δεν είναι πάντα αντιμεταθετικό.
- Δηλαδή δεν ισχύει πάντα $AB = BA$.
- Γενικά ορίζουμε τον πίνακα $[A, B] = AB - BA$. Εάν $[A, B] = 0$ τότε οι πίνακες αντιμετατίθενται.
- Μία πολύ ενδιαφέρουσα ιδιότητα είναι πως εάν οι πίνακες A και B είναι κανονικοί και αντιμετατίθενται τότε είναι δυνατόν να βρούμε μία ορθοκανονική βάση $|v_1\rangle, \dots, |v_N\rangle$ τέτοια ώστε τα $|v_i\rangle$ να είναι ταυτόχρονα ιδιοδιανύσματα και των δύο πινάκων.
- Αυτό σημαίνει ότι $A|v_i\rangle = \lambda_i |v_i\rangle$ και $B|v_i\rangle = \mu_i |v_i\rangle$ όπου λ_i και μ_i οι ιδιοτιμές που αντιστοιχούν στο $|v_i\rangle$ για τον A και B.

Ιδιοτιμές Ερμιτιανών πινάκων

- Οπως είχαμε δει, ένας Ερμιτιανός πίνακας A έχει την ιδιότητα, $A = A^{\mathrm{T}}$.
- Έστω λ μία ιδιοτιμή του A και $|\psi\rangle$ το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα. Τότε:

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

- Το Ερμιτιανό συζυγές της παραπάνω σχέσης θα δώσει:

$$\langle\psi| A^{\mathrm{T}} = \langle\psi| A = \lambda^* \langle\psi|$$

- Οπότε από την πάνω σχέση βρίσκουμε:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle = \lambda$$

- Οπότε από την κάτω σχέση βρίσκουμε:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda^*\langle\psi|\psi\rangle = \lambda^*$$

- Οπότε τελικά $\lambda^* = \lambda$ δηλαδή οι ιδιοτιμές του A *είναι πραγματικές*.

Ιδιοτιμές μοναδιαίων πινάκων

- Οπως είχαμε δει, ένας μοναδιαίος πίνακας U έχει την ιδιότητα, $UU^{\mathrm{T}} = U^{\mathrm{T}}U = I$.
- Έστω u μία ιδιοτιμή του U και $|u\rangle$ το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα. Τότε:

$$U|u\rangle = \lambda|u\rangle$$

- Το Ερμιτιανό συζυγές της παραπάνω σχέσης θα δώσει:

$$\langle u| U^{\mathrm{T}} = u^* \langle u|$$

- Οπότε από την πάνω σχέση βρίσκουμε:

$$\langle u|U^{\mathrm{T}}U|u\rangle = |u|^2 \langle u|u\rangle = \langle u|u\rangle$$

- Επομένως για έναν μοναδιαίο πίνακα, οι ιδιοτιμές πάντα θα έχουν μέτρο 1, δηλαδή:

$$|u|^2 = 1$$

Τα αξιώματα της Κβαντικής Φυσικής

- Οι κβαντικοί υπολογιστές υπακούουν τους νόμους της κβαντικής φυσικής.
- Επομένως για να εκτιμήσουμε καλύτερα τις δυνατότητες και τις προοπτικές τους θα πρέπει να καταλάβουμε τους περιορισμούς που τίθενται από την κβαντική φυσική.
- Τα αξιώματα της κβαντικής φυσικής έχουν προκύψει μετά από προσπάθεια πολλών ερευνητών για να περιγράψουν τον μικρόκοσμο.

Πρώτο Αξίωμα: Χώρος Hilbert

- Το πρώτο αξίωμα της κβαντικής φυσικής μας λέει κάτι που ήδη έχουμε συνηθίσει μέχρι τώρα.
- Ότι η κατάσταση ενός οποιουδήποτε συστήματος περιγράφεται από ένα μοναδιαίο *διάνυσμα κατάστασης* $|\psi\rangle$ σε ένα χώρο Hilbert.
- Ο χώρος Hilbert είναι ένας διανυσματικός χώρος που είναι εφοδιασμένος με ένα εσωτερικό γινόμενο.
- Ο διανυσματικός που θεωρούμε είναι το σύνολο των διανύσμάτων $|\psi\rangle$ με μιγαδικούς συντελεστές.
- Ορισμένες φορές το $|\psi\rangle$ ονομάζεται *κυματοσυνάρτηση*.

Διανυσματικός χώρος

- Ένας διανυσματικός χώρος είναι ένα σύνολο από στοιχεία $|v\rangle$ στα οποία έχουμε ορίσει έναν τελεστή πρόσθεσης $+$ και πληρούνται οι εξής ιδιότητες:
- $|v\rangle + (|w\rangle + |u\rangle) = (|v\rangle + |w\rangle) + |u\rangle$ - Προσαιτεριστική.
- $|v\rangle + |w\rangle = |w\rangle + |v\rangle$ - Αντιμεταθετική.
- υπάρχει ένα στοιχείο $|n\rangle$ τέτοιο ώστε $|n\rangle + |v\rangle = |v\rangle + |n\rangle = |v\rangle$ - Ουδέτερο στοιχείο.
- Για κάθε στοιχείο $|v\rangle$ υπάρχει ένα στοιχείο $|v'\rangle$ τέτοιο ώστε $|v\rangle + |v'\rangle = |n\rangle$ - Αντίθετο στοιχείο.
- Για κάθε βαθμωτό a και b ισχύει: $a(b\,|v\rangle) = ab\,|v\rangle$ - Βαθμωτός πολλαπλασιασμός.
- $1\,|v\rangle = |v\rangle$ - Πολλαπλασιαστική ταυτότητα.
- $(a+b)\,|v\rangle = a\,|v\rangle + b\,|v\rangle$ - Επιμεριστική ιδιότητα I
- $a(|v\rangle + |w\rangle) = a\,|v\rangle + a\,|w\rangle$ - Επιμεριστική ιδιότητα II

Εσωτερικό γινόμενο

- Το εσωτερικό γινόμενο είναι μία αντιστοίχηση δύο στοιχείων $|v\rangle$ και $|w\rangle$ σε έναν μιγαδικό αριθμό $\langle v|w\rangle$.
- Το εσωτερικό γινόμενο πρέπει να πληρεί τις εξής ιδιότητες:
- $\langle v|w\rangle = \langle w|v\rangle$ - συμμετρία συζυγούς.
- $\langle av + bw|u\rangle = a\langle v|u\rangle + b\langle w|u\rangle$ γα οποιαδήποτε a, b μιγαδικά - γραμμικότητα.
- $\langle v|v\rangle > 0$ εάν το $|v\rangle$ δεν είναι το ουδέτερο στοιχείο $|n\rangle$ - θετικότητα.
- $\langle n|n\rangle = 0$ - το ουδέτερο στοιχείο έχει εσωτερικό γινόμενο με τον εαυτό του 0.

Χώρος Hilbert και qubit

- Στην περίπτωση όπου εξετάζουμε την κατάσταση ενός αριθμού n από qubit το διάνυσμα κατάστασης τότε η διάσταση του $|\psi\rangle$ είναι $N \times 1$ όπου $N = 2^n$.

$$|\psi\rangle = a_{00\cdots 00}\,|\underbrace{00\cdots 00}_{n \text{ digits}}\rangle + a_{00\cdots 01}\,|00\cdots 01\rangle + \cdots + a_{11\cdots 11}\,|11\cdots 11\rangle$$

- το παραπάνω διάνυσμα κατάστασης περιέχει όλους τους πιθανούς συνδυασμούς των n qubit.
- Κάθε μία κατάσταση $|i_0, \cdots i_{n-1}\rangle$ όπου i_k είναι 0 ή 1 αποτελεί μέρος μίας βάσης για το διανυσματικό μας χώρο.
- Αν θεωρήσουμε την αριθμητική αναπαράσταση στο δεκαδικό σύστημα του $i_0 \cdots i_{n-1}$:

$$i = i_0 2^{n-1} + i_1 2^{n-2} + \cdots + i_{n-1}$$

- Τότε:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} a_i\,|i\rangle$$

Χώρος Hilbert και qubit

- Οι καταστάσεις $|i\rangle$ συχνά ονομάζονται *υπολογιστική βάση*.
- Σε κάθε $|\psi\rangle$ μπορούμε να αντιστοιχίσουμε ένα διάνυσμα $N \times 1$ με συντεταγμένες τα a_i:

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_{N-1} \end{bmatrix}$$

- Όπως έχουμε δει το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται ως εξής:

$$\langle \phi, \psi \rangle = \sum_{i=0}^{N-1} a_i b_i^*$$

- όπου b_i είναι οι συντεταγμένες του $|\phi\rangle$.
- Χρησιμοποιώντας αυτές τις ιδιότητες μπορούμε να δείξουμε εύκολα ότι τα $|\psi\rangle$ περιέχονται μέσα σε ένα χώρο Hilbert.
- Επιπλέον θα πρέπει $\langle \psi | \psi \rangle = 1$.

Σχετικά με το $|\psi\rangle$

- Τι είναι ακριβώς το $|\psi\rangle$;
- Πρόκειται για ένα θέμα που προκαλεί πολλούς πονοκεφάλους στους φυσικούς.
- Κάθε σύστημα περιγράφεται από ένα δικό του διάνυσμα κατάστασης $|\psi\rangle$ *αρκεί να είναι απομονωμένο*.
- Τίποτα όμως δεν είναι απολύτως απομονωμένο. Επομένως το διάνυσμα κατάστασης που πραγματικά υπάρχει είναι το $|\Psi\rangle$ *ολόκληρου του σύμπαντος* !
- Όμως όταν περιγράφουμε τι συμβαίνει σε ένα qubit στην γη δεν χρειάζεται να ασχολούμαστε με το τι γίνεται στο Α του Κενταύρου (ή ακόμα και στο διπλανό data-center).
- Επομένως μπορούμε *κατά προσέγγιση* να περιγράψουμε τα qubit μας ένα ξεχωριστό $|\psi\rangle$ που δεν λαμβάνει υπόψη του το υπόλοιπο $|\Psi\rangle$.

Σχετικά με το $|\psi\rangle$

- Το $|\psi\rangle$ λοιπόν υπάρχει κατά προσέγγιση. Το $|\Psi\rangle$;
- Η επιστημονική κοινότητα ούτε για αυτό έχει αποφανθεί κατηγορηματικά.
- Το $|\psi\rangle$ και το $|\Psi\rangle$ είναι εργαλεία για να περιγράψουν τα συστήματα μας.
- Το αν αντιστοιχούν σε κάτι πραγματικό είναι μία άλλη υποθέση.
- Στο δικό μου μυαλό το $|\psi\rangle$ είναι κάτι σαν τον χρόνο t.
- Όλοι τον χρησιμοποιούμε αλλά κανείς δεν καταλαβαίνει ακριβώς τι είναι (τουλάχιστον έτσι πιστεύω εγώ!)
- Θα ξαναγυρίσουμε στο ερώτημα λίγο παρακάτω όταν δούμε και τα άλλα αξιώματα της κβαντικής φυσικής.

Δεύτερο Αξίωμα: Εξέλιξη

- Το δεύτερο αξίωμα έχει να κάνει με την εξέλιξη ενός κβαντικού συστήματος και λέει ότι η κυματοσυνάρτηση $|\psi(t)\rangle$ σε χρόνο t θα πρέπει να σχετίζεται με την αρχική κυματοσυνάρτηση βάσει μίας σχέσης:

$$|\psi(t)\rangle = U|\psi(0)\rangle$$

- όπου ο U είναι ένας μοναδιαίος πίνακα που καθορίζεται από την φύση του συστήματος.
- Για παράδειγμα εάν το σύστημα κάνει κάποιο υπολογισμό σε ένα qubit το U θα πρέπει να αντανακλά την αντίστοιχη πύλη που χρησιμοποιείται.
- Εφόσον το U είναι μοναδιαίος πίνακας, θα έχουμε $UU^{\mathrm{T}} = I$ δηλαδή το U αντιστρέφεται από το U^{T}. Άρα οποιαδήποτε επεξεργασία κάνουμε σε ένα σύστημα είναι *επί της αρχής αντιστρέψιμη*.
- Επομένως δεν μπορούμε να φτιάξουμε μη αντιστρέψιμα κβαντικά κυκλώματα. Δεν έχει νόημα να προσπαθούμε να υλοποιήσουμε πύλες που δεν είναι αντιστρέψιμες για παράδειγμα.

Η εξίσωση του Schrödinger

- Η εξέλιξη ενός κβαντικού συστήματος μπορεί να περιγραφεί από την εξίσωση του Schrödinger.
- Η εξίσωση αυτή είναι θεμελιώδης για την κβαντική φυσική και από αυτήν απορρέουν πολλά συμπεράσματα της.
- Συνδέει τη χρονική παράγωγο της κυματοσυνάρτησης $|\psi\rangle$ με έναν τελεστή $\mathcal{H}$ που καθορίζεται από το σύστημα και ονομάζεται η Χαμιλτονιανή του συστήματος.

$$j\hbar \frac{\mathrm{d}\,|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} = \mathcal{H}\,|\psi\rangle$$

- Το $\hbar$ ονομάζεται ανοιγμένη σταθερά του Planck και ισούται με 1.0546×10^{-34}Js.

Η Χαμιλτονιανή

- Η Χαμιλτονιανή είναι ένας τελεστής που δρα πάνω στο $|psi\rangle$.
- Είναι ερμιτιανός τελεστής. Δηλαδή: $\langle\phi|\mathcal{H}|\psi\rangle = \langle\psi|\mathcal{H}|\phi\rangle^*$.
- Στην κβαντική φυσική υπάρχει μία αντιστοίχιση μεταξύ τελεστών και πινάκων όπως έχουμε ήδη δει.
- Αυτό οφείλεται στο ότι αν βρούμε μία ορθοκανονική βάση $|v_m\rangle$ που παράγει όλα τα $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{m=0}^{N-1} a_m |v_m\rangle$$

- Τότε η δράση κάθε τελεστή όπως το $\mathcal{H}$ μπορεί να περιγραφεί ως εξής:

$$|\phi\rangle = \mathcal{H}|\psi\rangle = \sum_{m=0}^{N-1} a_m \mathcal{H} |v_m\rangle$$

Το $|\psi\rangle$ ενός σωματιδίου

- Στην περίπτωση όπου η εξίσωση περιγράφει ένα σωματίδιο όπως θα δούμε και παρακάτω, τότε το $|\psi\rangle$ σχετίζεται με την πυκνότητα πιθανότητας το σωματίδιο να βρεθεί σε μία συγκεκριμένη θέση.
- Αν το σωματίδιο έχει μάζα m και κινείται μόνο σε μία διεύθυνση x τότε απουσία οποιοδήποτε πεδίου η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

- Το $|\,|\psi(x,t)\rangle\,|^2$ είναι η πυκνότητα πιθανότητας την χρονική στιγμή t το σωματίδιο να βρεθεί στη θέση x.
- Ως πυκνότητα πιθανότητας θα πρέπει το ολοκλήρωμα της να ισούται με 1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\,|\psi(x,t)\rangle\,|^2 \mathrm{d}x = 1$$

Λύνοντας την εξίσωση Schrödinger

- Η εξίσωση Schrödinger είναι μία εξίσωση εξέλιξης: Μας βοηθάει να υπολογίσουμε το $|\psi(x,t)\rangle$ αν γνωρίζουμε την τιμή $|\psi(x,t_0)\rangle$ του μία αρχική στιγμή $t = t_0$.
- Για λίγο ας ξεχάσουμε για λίγο το συμβολισμό Dirac και ας συμβολίσουμε το $|\psi(x,t)\rangle$ απλά ως $\psi(x,t)$.
- Η εξίσωση Schrödinger γράφεται ως εξής:

$$j\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

Ελεύθερη κίνηση

- Ας θεωρήσουμε ότι έχουμε μία αρχική κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x,0) \propto \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

- Αν θεωρήσουμε το $|\psi(x,0)|^2$ βλέπουμε ότι αυτό αντιστοιχεί σε μία κανονική κατανομή $\propto \exp(-x^2/\sigma^2)$ που περιγράφει την θέση του σωματιδίου.
- Στο μαθηματικό συμπλήρωμα δείχνουμε ότι λύνοντας την συνάρτηση του Schrödinger βρίσκουμε ότι με την πάροδο του χρόνου διατηρείται η παραπάνω σχέση μόνο που πρέπει να αντικαταστήσουμε το αρχικό σ με μία παράμετρο $w(t)$:

$$\psi(x,t) \propto \exp\left(-\frac{x^2}{2w^2(t)}\right)$$

- όπου το $w(t)$ δίνεται από την σχέση:

$$w^2(t) = \sigma^2 \left(1 + \left(\frac{ht}{m\sigma^2}\right)^2\right)$$

Schrödinger εναντίον Νεύτωνα

- Άρα στην κβαντική φυσική η πυκνότητα πιθανότητας να βρούμε το σωματίδιο σε μία θέση x *διευρύνεται* όσο περνάει ο χρόνος t.
- Αυτό συμβαίνει επειδή το $w(t)$ αυξάνει με την πάροδο του χρόνου.
- Μεγαλύτερο $w(t)$ σημαίνει μεγαλύτερη αβεβαιότητα.
- Η φυσική του Νεύτωνα μας παρέχει μία διαφορετική εικόνα. Με την πάροδο του χρόνου ένα σωματίδιο κινείται προς μία συγκεκριμένη διεύθυνση με ταχύτητα v.
- Αν έχουμε μία αβεβαιότητα ως προς την θέση του σωματιδίου αυτή απλά ταξιδεύει με το v. Παραμένει όμως η ίδια!

Τελεστές και πίνακες

- Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο έχουμε:

$$\langle v_n|\phi\rangle = \langle v_n|\mathcal{H}|\psi\rangle = \sum_{m=0}^{N-1} \langle v_n|\mathcal{H}|v_m\rangle\, a_m$$

- Τα $|\phi\rangle$ και $|\psi\rangle$ περιγράφονται από διανύσματα $N \times 1$:

$$|\phi\rangle = \begin{bmatrix} b_0 \\ \vdots \\ b_{N-1} \end{bmatrix} \qquad |\psi\rangle = \begin{bmatrix} b_0 \\ \vdots \\ b_{N-1} \end{bmatrix}$$

- Οπότε αν θεωρήσουμε ένα $N \times N$ πίνακα M με στοιχεία $\mu_{nm} = \langle v_n|\mathcal{H}|v_m\rangle$ τότε σε μορφή πίνακα γράφουμε:

$$\begin{bmatrix} b_0 \\ \vdots \\ b_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_{00} & \cdots & \mu_{0,N-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mu_{N-1,0} & \cdots & \mu_{N-1,N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_{N-1} \end{bmatrix}$$

Τελεστές και πίνακες

- Επομένως κάθε τελεστής όπως η Χαμιλτονιανή $\mathcal{H}$ μπορεί να περιγραφεί ισοδύναμα από έναν πίνακα M.
- Τα στοιχεία του M υπολογίζονται από την δράση του τελεστή στις συναρτήσεις βάσεις $|v_m\rangle$.
- Πολλές ιδιότητες από τον τελεστή περνάνε στον πίνακα και αντίστροφα.
- Για παράδειγμα το γεγονός ότι ο τελεστής $\mathcal{H}$ είναι ερμιτιανός έχει ως αποτέλεσμα:

$$\mu_{nm} = \langle v_n|\mathcal{H}|v_m\rangle = \langle v_m|\mathcal{H}|v_n\rangle^* = \mu_{mn}^*$$

- Δηλαδή και ο πίνακας M είναι ερμιτιανός.
- Συχνά χρησιμοποιούμε το ίδιο σύμβολο για τον τελεστή και τον πίνακα του. Έτσι το $\mathcal{H}$ μπορεί να συμβολίζει τόσο τον τελεστή όσο και τον πίνακα της Χαμιλτονιανής.

Λύνοντας την εξίσωση του Schrödinger

- Η εξίσωση του Schrödinger καταλήγει σε μία μοναδιαία εξέλιξη σε συμφωνία με το δεύτερο αξίωμα της κβαντικής φυσικής.
- Για παράδειγμα ας θεωρήσουμε ότι το τελεστής $\mathcal{H}$ δεν αλλάζει με τον χρόνο.
- Θα δείξουμε ότι η λύση της εξίσωσης Schrödinger δίνεται από την:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{j\mathcal{H}t}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle$$

- Ας υπολογίσουμε την παράγωγο του $|\psi(t)\rangle$ ως προς το χρόνο:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\exp\left(-\frac{j\mathcal{H}t}{\hbar}\right)\right\}|\psi(0)\rangle = \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}|\psi(0)\rangle$$

- Για να παραγωγίσουμε τον τελεστή $U(t) = \exp(-j\mathcal{H}t/\hbar)$ που βρίσκεται στο δεύτερο μέρος πρέπει πάλι να σκεφτούμε ότι ο τελεστής είναι ισοδύναμος με έναν πίνακα.

Λύνοντας την εξίσωση του Schrödinger

- Τι σημαίνει παράγωγος ενός πίνακα U;
- Μπορούμε να ορίσουμε την παράγωγο με τον συνήθη τρόπο:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} \cong \frac{U(t+\Delta t) - U(t)}{\Delta t}$$

- Χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι $U(t) = \exp(-j\mathcal{H}t/\hbar)$ έχουμε:

$$U(t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{j\mathcal{H}(t+\Delta t)}{\hbar}\right)$$

- Μπορούμε να δείξουμε ότι:

$$\exp(A+B) = \exp(A)\exp(B)$$

- μόνο όταν $AB = BA$ *δηλαδή όταν οι πίνακες* A *και* B *αντιμετατίθενται.*

Λύνοντας την εξίσωση του Schrödinger

- Πράγματι εφόσον οι A, B αντιμετατίθενται θα διαγωνιοποιούνται και ταυτόχρονα, δηλαδή θα υπάρχει ένας μοναδιαίος πίνακας U τέτοιος ώστε:

$$A = U\Lambda_A U^{\mathrm{T}} \qquad B = U\Lambda_B U^{\mathrm{T}}$$

- Στις παραπάνω εξισώσεις τα Λ_A και Λ_B είναι διαγώνιοι πίνακες που περιέχουν τις ιδιοτιμές του A και του B.
- Προσθέτοντας τις παραπάνω σχέσεις:

$$A + B = U(\Lambda_A + \Lambda_B)U^{\mathrm{T}}$$

- Επομένως θα ισχύει:

$$\exp(A + B) = U \exp(\Lambda_A + \Lambda_B)U^{\mathrm{T}}$$

Λύνοντας την εξίσωση του Schrödinger

- Αν γράψουμε αναλυτικά πους διαγώνιους πίνακες βλέπουμε ότι:

$$\Lambda_A = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_N \end{bmatrix} \qquad \Lambda_B = \begin{bmatrix} \mu_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \mu_N \end{bmatrix}$$

- Οπότε:

$$\Lambda_A + \Lambda_B = \begin{bmatrix} \lambda_1 + \mu_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_N + \mu_N \end{bmatrix}$$

- και επίσης:

$$\exp(\Lambda_A + \Lambda_B) = \begin{bmatrix} e^{\lambda_1+\mu_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & e^{\lambda_N+\mu_N} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} e^{\lambda_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & e^{\lambda_N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{\mu_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & e^{\mu_N} \end{bmatrix} = \exp(\Lambda_A)\exp(\Lambda_B)$$

Λύνοντας την εξίσωση του Schrödinger

- Οπότε:

$$\exp(A+B) = U\exp(\Lambda_A+\Lambda_B)U^{\mathrm{T}} = U\exp(\Lambda_A)\exp(\Lambda_B)U^{\mathrm{T}} = \\ = U\exp(\Lambda_A)U^{\mathrm{T}}U\exp(\Lambda_B)U^{\mathrm{T}} = \exp(A)\exp(B)$$

- Αν θέσουμε:

$$A = -\frac{j\mathcal{H}t}{\hbar} \qquad B = -\frac{j\mathcal{H}\Delta t}{\hbar}$$

- είναι εύκολο να δείξουμε ότι $AB = BA$ οπότε

$$U(t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{j\mathcal{H}(t+\Delta t)}{\hbar}\right) = \\ \exp\left(-\frac{j\mathcal{H}t}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{j\mathcal{H}\Delta t}{\hbar}\right) = U(t)\exp\left(-\frac{j\mathcal{H}\Delta t}{\hbar}\right)$$

Λύνοντας την εξίσωση του Schrödinger

- Ας θυμηθούμε ότι:

$$\exp(A) = I + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$$

- οπότε και:

$$\exp\left(-\frac{j\mathcal{H}\Delta t}{\hbar}\right) = I - \frac{j\mathcal{H}\Delta t}{\hbar} + \left\{\text{όροι με } \frac{\Delta t^n}{n!} \text{ όπου } n \geq 2\right\}$$

- Για μικρά Δt θα έχουμε επομένως:

$$\exp\left(-\frac{j\mathcal{H}\Delta t}{\hbar}\right) \cong I - \frac{j\mathcal{H}\Delta t}{\hbar}$$

- και:

$$U(t+\Delta t) = U(t)\left(I - \frac{j\mathcal{H}\Delta t}{\hbar}\right)$$

Λύνοντας την εξίσωση του Schrödinger

- Τελικά υπολογίζουμε την παράγωγο ως εξής:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = \frac{U(t+\Delta t) - U(t)}{\Delta t} \cong -\frac{j\mathcal{H}}{\hbar}U(t)$$

- και επομένως:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi(t)\right\rangle = -\frac{j\mathcal{H}}{\hbar}U(t)\left|\psi(0)\right\rangle = -\frac{j\mathcal{H}}{\hbar}\left|\psi(t)\right\rangle$$

- και αλλάζοντας τους όρους καταλήγουμε στην εξίσωση Schrödinger:

$$j\hbar\frac{\mathrm{d}\left|\psi\right\rangle}{\mathrm{d}t} = \mathcal{H}\left|\psi\right\rangle$$

- Επομένως η λύση της εξίσωσης του Schrödinger περιγράφεται από την σχέση:

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \exp\left(-\frac{j\mathcal{H}t}{\hbar}\right)\left|\psi(0)\right\rangle$$

Μοναδιαία εξέλιξη

- Ο τελεστής $U = \exp(-j\mathcal{H}t/\hbar)$ είναι μοναδιαίος.
- Πραγματι, ας θεωρήσουμε το ερμιτιανό συζηγές του πίνακα:

$$U^{\mathrm{T}} = \left(\exp\left(-\frac{j\mathcal{H}t}{\hbar}\right)\right)^{\mathrm{T}}$$

- Γενικά μπορούμε να δείξουμε ότι ο Ερμιτιανός συζυγής του $\exp(jA)$ όπου ο A είναι Ερμιτανός πίνακας, δηλαδή $A = A^{\mathrm{T}}$ είναι ο $\exp(-jA)$.
- Εφόσον ο A είναι Ερμιτιανός τότε διαγωνιοποιείται ως $A = V\Lambda V^{\mathrm{T}}$ και θα ισχύει:

$$\exp(jA) = V\exp(j\Lambda)V^{\mathrm{T}}$$

- Ο πίνακας Λ περιέχει τις ιδιοτιμές του A που είδαμε ότι είναι πραγματικές αφού ο A είναι Ερμιτιανός.

Μοναδιαία εξέλιξη

- Ο Ερμιτιανός του $\exp(jA)$, υπολογίζεται από την σχέση:

$$(\exp(jA))^{\mathrm{T}} = (V\exp(j\Lambda)V^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} = V(\exp(j\Lambda))^{\mathrm{T}}V^{\mathrm{T}}$$

- Ας γράψουμε πάλι τον Λ στην πλήρη του μορφή:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_N \end{bmatrix} \rightarrow \exp(j\Lambda) = \begin{bmatrix} \mathrm{e}^{j\lambda_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \mathrm{e}^{j\lambda_N} \end{bmatrix}$$

- Βλέπουμε ότι:

$$(\exp(j\Lambda))^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \mathrm{e}^{-j\lambda_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \mathrm{e}^{-j\lambda_N} \end{bmatrix} = \exp(-j\Lambda)$$

Μοναδιαία εξέλιξη

- Οπότε:

$$(\exp(jA))^{\mathrm{T}} = V\exp(-j\Lambda)V^{\mathrm{T}}$$

- Από την άλλη αν θεωρήσουμε τον πίνακα $-A$ αυτός είναι πάλι Ερμιτιανός και διαγωνιοποιείται ως εξής:

$$-A = V(-\Lambda)V^{\mathrm{T}}$$

- και:

$$\exp(-jA) = V\exp(-j\Lambda)V^{\mathrm{T}}$$

- Οπότε:

$$(\exp(jA))^{\mathrm{T}} = \exp(-jA)$$

- Επίσης:

$$(\exp(jA))^{\mathrm{T}}\exp(jA) = \exp(-jA)\exp(jA) = \exp(0) = I$$

Δεύτερο Αξίωμα: Εξέλιξη

- Επομένως η εξέλιξη ενός κβαντικού συστήματος καθορίζεται από την εξέλιξη του $|\psi(t)\rangle$.
- Η εξέλιξη του $|\psi(t)\rangle$ καθορίζεται από την εξίσωση του Schrondiger:

$$j\hbar \frac{\mathrm{d}\,|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} = \mathcal{H}\,|\psi\rangle$$

- όπου το $\mathcal{H}$ είναι η Χαμιλτονιανή του συστήματος και καθορίζεται από την φύση του.
- Αν το $\mathcal{H}$ δεν εξαρτάται από τον χρόνο η λύση της εξίσωσης γράφεται και ως:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{j\mathcal{H}t}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle$$

- Δείξαμε ότι η παραπάνω σχέση συνεπάγεται μοναδιαία εξέλιξη αφού ο τελεστής $U = \exp(-j\mathcal{H}t/\hbar)$ είναι μοναδιαίος.

Ιδιοκαταστάσεις ενέργειας

- Ο τελεστής $\mathcal{H}$ είναι Ερμιτιανός οπότε διαγωνιοποιείται.
- Ας συμβολίσουμε με E_i και $|E_i\rangle$ τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του $\mathcal{H}$ που αποτελούν μία ορθοκανονική βάση.
- Όπως είχαμε δει ο $\mathcal{H}$ θα μπορεί να γραφεί ως άθροισμα των ιδιοτιμών του και των προβολών στα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=0}^{N-1} E_i \, |E_i\rangle \langle E_i|$$

- Ο μοναδιαίος τελεστής U γράφεται:

$$U = \sum_{i=0}^{N-1} \exp\left(-\frac{jE_i}{\hbar} t\right) |E_i\rangle \langle E_i|$$

- Ας υποθέσουμε τώρα ότι η αρχική κατάσταση $|\psi(0)\rangle$ είναι ένα από τα $|E_l\rangle$.

Ιδιοκαταστάσεις ενέργειας

- Τότε η λύση γράφεται:

$$|\psi(t)\rangle = U|\psi(0)\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} \exp\left(-\frac{jE_i}{\hbar}t\right)|E_i\rangle\langle E_i|E_l\rangle = \exp\left(-\frac{jE_l}{\hbar}t\right)|E_l\rangle$$

- Δηλαδή ένα σύστημα που ξεκινάει στην $|E_l\rangle$ στην ουσία παραμένει στην $|E_l\rangle$ εφόσον με την πάροδο του χρόνου απλά το πλάτος αλλάζει κατά $\exp\left(-\frac{jE_l}{\hbar}t\right)|E_l\rangle$
- Είχαμε πει ότι στην ουσία οι καταστάσεις $|\psi\rangle$ και $\exp(j\phi)|\psi\rangle$ είναι ίδιες.
- Τα $|E_i\rangle$ ονομάζονται *ιδιοκαταστάσεις ενέργειας*

Qubits (σε πηγάδια)

- Ας θεωρήσουμε ένα σωματίδιο με μάζα m, το οποίο βρίσκεται υπό την επήρεια ενός ηλεκτρικού πεδίου με τάση $V(x)$.
- Στην περίπτωση αυτή η Χαμιλτονιανή έχει δύο συνιστώσες: μία η οποία οφείλεται στην κίνηση στον ελεύθερο χώρο:

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$$

- Η δεύτερη συνεισφορά οφείλεται στο δυναμικό

$$\mathcal{H}_1 = V(x)$$

- Η συνολική Χαμιλτονιανή γράφεται

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$$

Qubits (σε πηγάδια)

- Για να γλιτώσουμε λίγο χώρο στις εξισώσεις ας χρησιμοποιήσουμε το ψ αντί του $|\psi\rangle$.
- Για να βρούμε τις ιδιοκαταστάσεις ενέργειας θα πρέπει να λύσουμε την εξίσωση:

$$\mathcal{H}\psi = E\psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

- Θεωρούμε ότι $V(x) = 0$ για $0 \leq x \leq L$ και $V(x) = \infty$ διαφορετικά.
- Στη περιοχή όπου το $V(x)$ απειρίζεται ο μόνος τρόπος για να υπάρχει λύση είναι να έχουμε $\psi = 0$.
- Επομένως $\psi(x) = 0$ για $x < 0$ και $x > L$.
- Για $0 \leq x \leq L$ θα έχουμε:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + E\psi = 0$$

Qubits (σε πηγάδια)

- Αν θέσουμε:

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

- Τότε η εξίσωση που έχουμε να λύσουμε γίνεται:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \alpha^2\psi = 0$$

- Είναι εύκολο να δούμε ότι το $\sin(\alpha x)$ είναι λύση της εξίσωσης, αφού:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sin(\alpha x)\right) = \alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\cos(\alpha x)\right) = -\alpha^2\sin(\alpha x) = -\alpha^2\psi$$

- Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε ότι και το $\cos(\alpha x)$ είναι λύση.
- Η γενικότερη λύση είναι της μορφής:

$$\psi = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x)$$

Qubits (σε πηγάδια)

- Θα πρέπει τώρα να “ταιριάξουμε” την γενική λύση στην περίπτωση μας όπου θα πρέπει $\psi(0) = \psi(L) = 0$.
- Εφόσον το $\sin(\alpha x)$ μηδενίζεται στο $x = 0$ μπορούμε απλά να επιλέξουμε $B = 0$.
- Επίσης για να έχουμε $\psi(L) = 0$ θα πρέπει $\sin(\alpha L) = 0$ οπότε:

$$\alpha = \mu \tfrac{\pi}{L} \text{ ,όπου το } \mu \text{ είναι ακέραιος}$$

- Η λύση γράφεται:

$$\psi(x) = A \sin\left(\tfrac{\mu\pi}{L}\right)$$

- Επειδή πρέπει το ολοκλήρωμα του $|\psi|^2$ να είναι ίσο με ένα:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = |A|^2 \int_0^L \sin^2(\alpha x)\, \mathrm{d}x \qquad (1)$$

Qubits (σε πηγάδια)

- Από το τυπολόγιο των ολοκληρωμάτων και επειδή $\sin(2\alpha L) = \sin(2m\pi) = 0$, θα έχουμε:

$$\int_0^L \sin^2(\alpha x)\mathrm{d}x = \left[\frac{x}{2} - \frac{\sin(2\alpha x)}{4\alpha}\right]_0^L = \frac{L}{2}$$

- Επομένως για να είναι το ολοκλήρωμα του $|\psi|^2$ ίσο με 1 θα πρέπει

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

- Οπότε τελικά η ιδιοσυνάρτηση δίνεται από την σχέση:

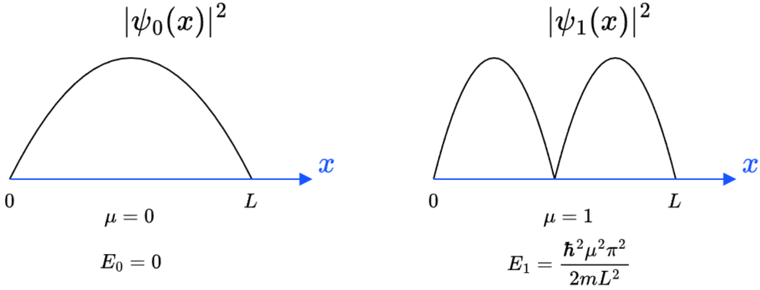
$$\psi_\mu(x) = \sqrt{\tfrac{2}{L}} \sin\left(\tfrac{\mu\pi}{L}x\right) \tag{2}$$

- Ενώ η αντίστοιχη ιδιοτιμή:

$$E_\mu = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 = \frac{\hbar^2\mu^2\pi^2}{2mL^2}$$

Qubits (σε πηγάδια)

- Παρακάτω βλέπουμε τη μορφή του $\psi_\mu(x)$ για $\mu = 0$ και $\mu = 1$.



Qubits (σε πηγάδια)

- Παρατηρούμε ότι οι ιδιοτιμές E_μ είναι *κβαντισμένες*!
- Δηλαδή η ενέργεια του σωματιδίου μπορεί να πάρει συγκεκριμένες τιμές που είναι ανάλογες του τετραγώνου μ^2 ενός ακεραίου μ.
- Αυτό είναι ένα καθαρά κβαντικό φαινόμενο. Στον κλασικό κόσμο δεν υπάρχει κάποιος λόγος που να περιορίζει τις τιμές της ενέργειας ενός σωματιδίου σε συγκεκριμένες διακριτές τιμές.
- Θεωρητικά θα μπορούσαμε να αντιστοιχήσουμε το $|0\rangle$ σε μία ενεργειακή κατάσταση (π.χ. την $\mu = 0$) και την $|1\rangle$ σε μία άλλη (π.χ. $\mu = 1$).
- Ωστόσο σε μία τέτοια υλοποίηση πως θα μπορούσαμε να επέμβουμε πάνω στο qubit που θα ήταν ένα σωματίδιο;
- Ίσως να εφαρμόζαμε κάποια τάση (διαφορά δυναμικού) και να προκαλούσαμε την μετάβαση από την μία κατάσταση στην άλλη.